Title	10.CAMとクラスター変分法について(基研研究会「相転移研究の新手法とその応用」,研究会報告)
Author(s)	藤木, 澄義
Citation	物性研究 (1989), 51(5): 430-432
Issue Date	1989-02-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/93554
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

10．ＣＡＭとクラスター変分法について

東北大・工　　　藤木　澄義

クラスター変分法は1951年に Kikuchi[1]によって初めて Ising 模型に対して定式化され、平均場近似に比べて極めて優れた近似シリーズとして高く評価されている。このクラスター変分法は1957年に Morita[2]によって量子スピン系等への適用を可能にした新しい定式化が行われ、磁性体の理論、液体論や合金理論などに応用されてきた。Moritaの方法は又ランダム系への拡張が容易で、スピングラス等におけるフラストレーション効果を調べるのに適している。1986年のＣＡＭ理論の登場[3] により、クラスター変分法は臨界現象への応用という新しい局面を迎えた。ＣＡＭ理論では厳密解への収束性の良い近似シリーズを用いるほど高い精度の結果が得られると考えられる。この点においてクラスター変分法は今まで知られている近似法の中でも最も優れたものの一つと言える。更にクラスター変分法とＣＡＭ理論双方が備えている長所としてその適用範囲の広さが挙げられる。クラスター変分法は Ising 模型、ＸＹ模型、ハイゼンベルグ模型等の古典スピン系、量子スピン系、ランダム系などに応用できる。一方、ＣＡＭ理論は相転移を特徴づける物理量が求められ、厳密解に収束する近似シリーズ（カノニカルシリーズの一条件）にあまねく適用が可能と思われる。従って、種々の系へクラスター変分法を応用しＣＡＭ理論を用いて臨界現象を研究することができる。

クラスター変分法では基礎となるクラスターを大きくすることによって、転移温度や物理量の振舞をより高い精度で求めることが出来る。しかしクラスター変分法は平均場近似と同じ古典的臨界指数を与えるためＣＡＭ理論が出現するまで臨界現象の研究に用いられなかった。ＣＡＭ理論によれば少なくとも３つ以上の異なったレベルで、帯磁率などの物理量が得られれば、真の臨界温度とその物理量に対応した臨界指数が評価できる。クラスター変分法では、基礎となるクラスターに対し厳しくセルフコンシステンシーを要求するため、比較的小さなクラスターを用いても高い精度で転移温度が求められるが、クラスターを大きくするにつれ計算は大変になる。そこで、セルフコンシステンシーの条件を少し緩めて、代わりにクラスターを出来るだけ大きくして行くことも一つの方法である。このセルフコンシステンシーをどれだけ緩めるかによって種々のレベルのクラスター変分法のシリーズを考えることが出来る。例えば Yvon の近似を拡張した簡単化したクラスター変分法[4] がある。また基本クラスターを辺が重ならないように点で結んだカクタス近似[5,6] もクラスター変分法を簡単化したものとみなすことができる。このような色々なレベルのクラスター変分法をまとめて一つのカノニカルシリーズとして扱ってよい保証はないが、今まで調べた比較的小さなクラスターの範囲では一つのカノニカルシリーズとして扱ってよさそうである。以下詳細は原論文に譲ることとして結果を概観しつつ、一般にＣＡＭ理論を用いる際の注意点を述べる。

クラスター変分法の臨界現象への応用として、まず Katori and Suzuki[7] は３次元 Ising 模型に対し、帯磁率、自発磁化、比熱、緩和時間を平均場近似、Bethe 近似、四角近似によって求め、ＣＡＭ理論を用いてこれらの物理量から臨界温度と臨界指数を求めた。そして幾つかの物理量から独立に評価された臨界温度が互いに比較的一致していることや、臨界温度と臨界指数共に他の方法[9]によって評価されている値とよく一致していることを示した。これはＣＡＭ理論の正当性を裏付けるのみならず、クラスター変分法が比較的低い近似からカノニカルなシリーズとしてＣＡＭ解析に用いることが出来ることを意味する。彼等の結果によると種々の物理量の中でも帯磁率から評価された臨界温度が信頼できる値に最も近いが、臨界指数は一般にオーバーエスティメイトする傾向にあり、ＣＡＭによって評価された３次元 pure Ising 模型の帯磁率の臨界指数は他の方法[9] によって評価されている値 1.25 に比べて５％程大きい。一方、Fujiki[8] はｄ次元立方格子上の pure Ising 模型の一様帯磁率、及びランダムボンド Ising 模型のスピングラス帯磁率の発散係数を平均場近似、Bethe 近似、カクタス四角近似、及び四角近似で求めＣＡＭによって臨界温度と臨界指数を評価した。結果、２次元 pure 系では厳密解と大変よい一致をみたが､このとき最低次の平均場近似はＣＡＭ解析には用いない方がよいことがわかった。一般に、４つ以上の近似が用意された場合、最低次の平均場近似はＣＡＭ解析から除いた方がよい結果が得られるようだが､四角近似までを３次元系に応用する場合はあまり差異がない。これに関しては後ほどふれる。一方、ランダム系においては、ＣＡＭ解析の結果２次元系ではスピングラス転移が有限温度で得られず、３次元系ではモンテカルロ法[10]で評価されている臨界温度および臨界指数の夫々の上限に近い値を得た。

上で四角近似までのクラスター変分法をＣＡＭで解析すると、２次元系では大変よい結果が得られるが３次元系ではあまりよくないことを述べた。この理由は格子の次元と基礎にとるクラスターの次元の不一致によるものと思われる。すなわち３次元系をよりよい精度で議論するには３次元的なクラスターをとる必要がある。そこで KatoriとFujiki[11] は cube 近似を用いて３次元 pure Ising 模型を調べた。種々のクラスター変分法による転移温度と帯磁率の発散係数を表１に示す。同じ帯磁率のデーターをＣＡＭ解析するにも、物理変数の選び方（帯磁率か、磁化の揺らぎか）、温度変数の選び方（温度そのものか、温度の逆数か、さらにそれの tanh をとったものか）、さらに温度を転移温度で規格化するかしないか、によって得られる値は少しづつ違ってくる。さらにサンプリングされる近似によって結果に違いが出てくることも注意を要する。色々な組合せを調べた結果、転移温度で規格化された温度を変数として Bethe 近似、カクタス cube 近似、Yvon's cube 近似、 full cube 近似による帯磁率をＣＡＭ解析し、臨界温度と臨界指数の最適値を求めるのが一番よいことがわかった。その結果はモンテカルロ法等によって得られている現在最も信頼されている値と共に表２に示す。このような変数及び近似の選び方が一般に良いという保証はなく、対象とする模型及び用いる近似のシリーズに依存することも考えられる。今後種々の模型と近似に対してＣＡＭ解析の方法論を確立してゆく必要がある。

表1． 3次元立方格子上の pure Ising 模型の、m次近似による転移温度 T(m) と一様帯磁率χ(m)の発散係数 C(m)。 $\chi(m) = C(m)T(m) / (T - T(m))$。

m	近似	kT(m)/J	C(m)
0	平均場	3.0	0.1667
1	Bethe	2.4663	0.25
2	カクタス四角	2.4464 [5]	0.2581
3	カクタスcube	2.4196 [6]	0.2709
4	Yvon's 四角	2.3806 [4]	0.2786
5	Yvon's cube	2.3523 [4]	0.3102
6	full 四角	2.3049 [5]	0.4000 [7]
7	full cube	2.2905 [1]	0.4129 [11]

表2． 3次元立方格子上の pure Ising 模型に対する表1の近似のサンプリングとCAMによって評価された臨界温度と一様帯磁率の臨界指数。

サンプル番号m	kTc/J	γ
0, 1, 6	2.25645	1.32
1, 2, 6	2.2562	1.32
1, 3, 5, 7	2.25631	1.27
他の方法[9]	2.255	1.25

References

[1] R. Kikuchi, Phys. Rev. 81 (1951) 988.
[2] T. Morita, J. Phys. Soc. Jpn. 12 (1957) 753, 1060.
[3] M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) 4205.
[4] T. Morita, Physica A (1989) to appear.
[5] S. Katsura and S. Fujiki, J. Phys. C 13 (1980) 4711, 4723.
[6] S. Fujiki, Y. Abe and S. Katsura, Comp. Phys. Comm. 25 (1982) 119.
[7] M. Katori and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. 57 (1988) 3753.
[8] S. Fujiki, in Proceedings of YKIS'88 "Cooperative Dynamics in Complex Physical Systems" Kyoto, 1988, to be published by Springer-Verlag.
[9] References cited in [7].
[10] A. T. Ogielski, Phys. Rev. B 32 (1985) 7384.
R. N. Bhatt and A. P. Young, Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 924.
[11] S. Fujiki and M. Katori, in preparation.